

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

☒ posudek vedoucího
☒ bakalářské práce

☐ posudek oponenta
☐ diplomové práce

Autorka: **Veronika Vranková**

Název práce: **Potential energy surface of the HeNO⁺ complex**

Studijní program a obor: **Fyzika / Obecná fyzika**

Rok odevzdání: **2021**

Jméno a tituly vedoucího: **doc. Ing. Pavel Soldán, Dr.**

Pracoviště: **Katedra chemické fyziky a optiky**

Kontaktní e-mail: **pavel.soldan@mff.cuni.cz**

Odborná úroveň práce:

☒ vynikající ☐ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Věcné chyby:

☒ téměř žádné ☐ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ☐ méně podstatné četné ☐ závažné

Výsledky:

☐ originální ☒ původní i převzaté ☐ netriviální kompilace ☐ citované z literatury ☐ opsané

Rozsah práce:

☐ veliký ☒ standardní ☐ dostatečný ☐ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

☐ vynikající ☒ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Tiskové chyby:

☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ☐ četné

Celková úroveň práce:

☒ vynikající ☐ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:

Práce slečny Vrankové se zabývá konstrukcí plochy potenciální energie komplexu HeNO^+ (ze mnou dodaných *ab initio* dat). V roce 2019 mne totiž kontaktoval prof. Helge Skullerud z Trondheimu s tím, že by rád přepočítal mobilitu molekulárního iontu NO^+ v heliu, protože nyní tokijská skupina prof. Hajime Tanuma provádí experimentální výzkum mobility diatomických molekulárních iontů v heliu při nízkých srážkových energiích (řádově meV). Základem pro odpovídající dynamické výpočty transportních koeficientů jsou co nejpřesnější plochy potenciální energie molekulární iont-helium. Moje plocha, publikovaná v roce 2002, byla určena pro výpočty nízko ležících rotačně-vibrační stavů a není příliš vhodná pro rozptylové výpočty při takto nízkých energiích. Proto jsem se rozhodl pro konstrukci nové plochy, která by se pro tyto výpočty hodila více.

K úspěšnému splnění zadání slečna Vranková musela

- s použitím multipólového rozvoje odvodit konkrétní asymptotiku plochy potenciální energie HeNO^+ při velkých vzdálenostech He od NO^+ ,
- nastudovat interpolační/extrapolační metodu „reciprocal-power reproducing kernel Hilbert space“ (RP-RKHS),
- odvodit konkrétní tvar reprodukčního jádra pro případ HeNO^+ ,
- zkombinovat metodu RP-RKHS s Gaussovou-Legendreovou kvadraturou (GLQ),
- naprogramovat kombinovanou metodu ve Fortranu,
- provést odpovídající výpočet,
- analyzovat asymptotiku vzniklé plochy a nalézt kritické body na této ploše.

Zadání práce bylo splněno. Získané výsledky ukázaly nutnost modifikace kombinované metody RP-RKHS - GLQ za účelem získání plochy, která bude mít kvalitativně (a v tomto případě i kvantitativně) správné aspoň první dva vedoucí členy asymptotického rozvoje. Zároveň se ukázala potřeba dopočítat *ab initio* data pro velmi krátké a velmi dlouhé vzdálenosti mezi heliem a těžištěm NO^+ . To bude předmětem budoucí studie.

Práce slečny Vrankové je napsána přehledně a s dostatečným důrazem na důležité detaily. Během jejího vypracování slečna Vranková byla aktivní a pracovala zodpovědně a svědomitě. Proto doporučuji tuto práci uznat jako bakalářskou a navrhuji její hodnocení stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Žádné.

Práci

☒ doporučuji

☐ nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☒ výborně ☐ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

V Praze, 19. 1. 2021

doc. Ing. Pavel Soldán, Dr.